ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1981, т. 22, № 1

УДК 621.315.592

А. Г. МИРОНОВ

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В ОБОБЩЕННОЙ ДВУХЗОННОЙ МОДЕЛИ

Экспериментальные данные по свойствам узкозонных полупроводников часто интерпретируются с помощью простых моделей энергетического спектра носителей заряда в актуальной области энергий — при значениях ее, отстоящих от краев зон на величины порядка ширины запрещенной зоны E_g или меньшие. Так, при анализе данных по термо-ЭДС в сильном магнитном поле в $Pb_{1-x}Sn_xTe$ [1] использовались известные модели Кейна и Коэна. Однако преимущества этих моделей, связанные с простотой аналитических выражений для законов дисперсии и энергетической зависимости плотности состояний по энергии, $\rho(E)$, в значительной мере обесцениваются необходимостью вводить для описания экспериментальных данных подгоночный параметр, так называемую «эффективную ширину запрещенной зоны».

В настоящей работе рассмотрена более общая модель спектра носителей заряда в узкозонном полупроводнике, являющаяся вариантом шестизонной модели Диммока [2] и полнее учитывающая влияние дальних энергетических зон. Основное дисперсионное уравнение для валентной зоны и зоны проводимости при этом имеет следующий вид:

$$(E-E_g/2-\hbar^2k_\perp^2/2m_t^- -\hbar^2k_\parallel^2/2m_\parallel^-)\times$$
$$\times(E+E_g/2+\hbar^2k_\perp^2/2m_t^+ +\hbar^2k_\parallel^2/2m_\parallel^+)=P_\perp^2k_\perp^2+P_\parallel^2k_\parallel^2. \qquad (1)$$

Здесь за начало отсчета энергии принята середина запрещенной зоны, поперечная и продольная компоненты квазиволнового вектора $k_\perp$ и $k_\parallel$ отсчитываются от какой-либо точки L в зоне Бриллюэна (для не слишком удаленных от краев зон энергий E ограничимся независимым рассмотрением каждой из четырех пар экстремумов у точек L). Вклады в эффективные массы от дальних зон даются величинами, содержащими $m_t^\pm$ и $m_l^\pm$ (знак минус относится к электронам, плюс — к дыркам); $P_\perp$ и $P_\parallel$ — междузонные матричные элементы соответственно поперечной и продольной компонент оператора импульса. Подобная модель была применена при определении параметров зонной структуры твердого раствора $Pb_{1-x}Sn_xSe$ [3]. Однако ее использование затрудняется отсутствием соответствующих расчетов для плотности состояний и различных равновесных величин, связанных с ней, даже в сравнительно простом случае спектра, симметричного по отношению к электронам и дыркам. Этот случай имеет место, например, для материалов $Pb_{1-x}Sn_xTe$ и $Pb_{1-x}Sn_xSe$ при $x\leqslant 0{,}2$. При этом $m_\perp^-=m_\perp^+=m_\perp$ и $m_\parallel^-=m_\parallel^+=m_\parallel$. Обозначим через m_t и m_l соответственно поперечную и продольную эффективные массы вблизи краев зон:

$$m_t^{-1}=m_\perp^{-1}+2P_\perp^2/\hbar^2E_g,\quad m_l^{-1}=m_\parallel^{-1}+2P_\parallel^2/\hbar^2E_g. \qquad (2)$$

Введем параметры $\alpha_\perp$ и $\alpha_\parallel$, дающие относительные вклады влияния дальних зон в величины m_t^{-1} и m_l^{-1}:

$$\alpha_\perp = m_t/m_\perp, \quad \alpha_\parallel = m_l/m_\parallel. \tag{3}$$

Вычислим теперь плотность и число состояний в зоне (ввиду симметрии спектра ограничимся лишь зоной проводимости) как функции энергии E и этих параметров.

Для плотности состояний по энергии с учетом двукратного вырождения и наличия $M=4$ пар экстремумов мы имеем

$$\rho(E) = \frac{M}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_\parallel \int_0^\infty k_\perp dk_\perp \delta(E - E(k_\parallel, k_\perp)). \tag{4}$$

Введем также величину $N(E)$ — число состояний в зоне с энергиями не больше E:

$$N(E) = \int_{E_g/2}^{E} dE' \rho(E'). \tag{5}$$

Введем безразмерные энергию, ε, и квазиволновой вектор с компонентами $q_\perp$ и $q_\parallel$:

$$\varepsilon = E/E_g, \; q_\perp = \hbar k_\perp/\sqrt{2m_t E_g}, \; q_\parallel = \hbar k_\parallel/\sqrt{2m_l E_g}. \tag{6}$$

Тогда дисперсионное уравнение (1) для симметричного спектра можно записать в виде

$$\varepsilon^2 - \left(\frac{1}{2} + \alpha_\parallel q_\parallel^2 + \alpha_\perp q_\perp^2\right)^2 = (1-\alpha_\parallel) q_\parallel^2 + (1-\alpha_\perp) q_\perp^2. \tag{7}$$

Переходя с помощью (6) и (3) к безразмерным переменным в формулах (4) и (5), мы получаем

$$\rho(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_\parallel \int_0^\infty q_\perp dq_\perp \delta(\varepsilon - \varepsilon_-(q_\parallel, q_\perp)) = E_g^{-1} \frac{dN(E)}{d\varepsilon}, \tag{8}$$

$$N(E) = AE_g \int_{-\infty}^{\infty} dq_\parallel \int_0^\infty q_\perp dq_\perp \Theta(\varepsilon - \varepsilon_-(q_\parallel, q_\perp)), \tag{9}$$

где Θ — обычная ступенчатая функция, $A = Mm_t\sqrt{2m_l E_g}/\pi^2\hbar^3$,

$$\varepsilon_-(q_\parallel, q_\perp) = \left[\left(\frac{1}{2} + \alpha_\parallel q_\parallel^2 + \alpha_\perp q_\perp^2\right)^2 + (1-\alpha_\parallel) q_\parallel^2 + (1-\alpha_\perp) q_\perp^2\right]^{1/2}. \tag{10}$$

Интегрирование по $q_\perp$ в (9) дает

$$N(E) = \frac{AE_g}{2\alpha_\perp^2} \int_0^{q_{\parallel\max}} dq_\parallel \left[\sqrt{t + 4\alpha_\perp q_\parallel^2 (\alpha_\parallel - \alpha_\perp)} - 1 - 2\alpha_\perp \alpha_\parallel q_\parallel^2\right], \tag{11}$$

где

$$q_{\parallel\max}^2 = \left(\sqrt{1 + \alpha_\parallel^2 g^2} - 1\right) \Big/ 2\alpha_\parallel^2, \tag{12}$$

$$g^2 = g^2(\varepsilon) = 4\varepsilon^2 - 1, \; t = t(\varepsilon) = 1 + \alpha_\perp^2 g^2(\varepsilon). \tag{13}$$

Дифференцированием по ε отсюда нетрудно получить

$$\rho(E) = 2A\varepsilon \int\limits_0^{q_{\parallel\max}} dq_{\parallel} \left[t + 4\alpha_{\perp} q_{\parallel}^2 (\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp})\right]^{-1/2}. \tag{14}$$

Введем обозначение

$$\gamma^2 = 2\alpha_{\perp} |\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}| \left(\sqrt{1 + \alpha_{\parallel}^2 g^2} - 1\right) \Big/ t\alpha_{\parallel}^2. \tag{15}$$

Интегрирование по $q_{\parallel}$ в формулах (11), (14) дает для $\alpha_{\parallel} > \alpha_{\perp}$:

$$N(E) = AE_g \{t[\gamma\sqrt{1+\gamma^2} + \ln(\gamma + \sqrt{1+\gamma^2})] - 2\gamma\sqrt{t} - \gamma^3 t^{3/2} \alpha_{\parallel}/3(\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp})\} \left[8\alpha_{\perp}^2 \sqrt{\alpha_{\perp}(\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp})}\right]^{-1}, \tag{16}$$

$$\rho(E) = A\varepsilon \ln(\gamma + \sqrt{1+\gamma^2}) \left[\alpha_{\perp} (\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp})\right]^{-1/2}. \tag{17}$$

В случае $\alpha_{\parallel} < a_{\perp}$ мы находим

$$N(E) = AE_g \{t(\arcsin\gamma + \gamma\sqrt{1-\gamma^2}) - 2\gamma\sqrt{t} - \alpha_{\parallel} \gamma^3 t^{3/2}/3(\alpha_{\perp} - \alpha_{\parallel})\} \left[8\alpha_{\perp}^2 \sqrt{\alpha_{\perp}(\alpha_{\perp} - \alpha_{\parallel})}\right]^{-1}, \tag{18}$$

$$\rho(E) = A\varepsilon \arcsin\gamma \cdot [\alpha_{\perp}(\alpha_{\perp} - \alpha_{\parallel})]^{-1/2}. \tag{19}$$

Наконец, в частном случае равного относительного влияния дальних зон на поперечную и продольную эффективные массы, т. е. при $\alpha_{\parallel} = \alpha_{\perp} = \alpha$, мы имеем

$$N(E) = \frac{\alpha E_g}{3\sqrt{2}\,\alpha^3} \left(\sqrt{1 + \alpha^2 g^2} - 1\right)^{3/2}, \tag{20}$$

$$\rho(E) = \frac{A\varepsilon\sqrt{2}}{\alpha\sqrt{1 + \alpha^2 g^2}} \left(\sqrt{1 + \alpha^2 g^2} - 1\right)^{1/2}. \tag{21}$$

Интересно сравнить полученные результаты для $\rho(E)$ и $N(E)$ с результатами частного случая $\alpha_{\parallel} = \alpha_{\perp} = 0$, отвечающего модели Кейна. В последнем случае мы имеем

$$N_0(E) = \frac{2}{3} AE_g (\varepsilon^2 - 1/4)^{3/2}, \tag{22}$$

$$\rho_0(E) = 2A\varepsilon(\varepsilon^2 - 1/4)^{1/2}. \tag{23}$$

Обозначим через f_N отношение $N(E)/N_0(E)$, а через f_ρ отношение $\rho(E)/\rho_0(E)$. Тогда для энергии $E = E_g/2 + 1{,}08\,E_g$ (отвечающей значению $g(\varepsilon) = 3$) и при $\alpha_{\perp} = 0{,}6$, $\alpha_{\parallel} = 0{,}5$ мы имеем $f_\rho = 0{,}42$, а при $E = 2{,}06\,E_g$ — $f_\rho = 0{,}31$. Заметно и влияние дальних зон на число состояний; так, при $\alpha_{\perp} = \alpha_{\parallel} = 0{,}50$ мы имеем $f_N = 0{,}50$ для $E = 1{,}5\,E_g$ и $f_N = 0{,}41$ для $E = 2\,E_g$. Поведение относительного отклонения плотности состояний от результата модели Кейна как функции энергии характеризуют следующие частные значения $f_\rho(E)$ для случая $\alpha_{\perp} = 0{,}6$; $\alpha_{\parallel} = 0{,}3$: $f_\rho(0{,}71) = 0{,}87$; $f_\rho(1{,}03) = 0{,}69$; $f_\rho(1{,}56) = 0{,}36$; $f_\rho(2{,}45) = 0{,}30$.

Полученные аналитические результаты для $N(E)$ позволяют также оценить влияние дальних зон и на концентрацию, n, электронов в зоне проводимости. Аналогично предыдущему относительное изменение n по сравнению с результатом для модели Кейна обозначим через f_n. Возьмем для примера два значения величины $\nu = E_g/kT$: $\nu_1 = 8{,}36$ и $\nu_2 = 18{,}4$, отвечающие материалу $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ при $T = 300$ и 80 К соответственно. Тогда, интегрируя произведение $N(E)$ с производной от фермиевского распределения по методу квадратур Гаусса [4], мы находим, что, например, для $\alpha=0{,}5$, $\nu=\nu_1$ и при значении уровня Ферми $\mu=\mu_1=-4\,kT$ $f_n=0{,}864$, а при $\mu=\mu_2=-kT$ имеем $f_n=0{,}857$; для $\alpha=0{,}5$ и $\nu=\nu_2$ мы имеем $f_n(\mu_1)=0{,}942$, $f_n(\mu_2)=0{,}939$. Таким образом, отклонения спектра от модели Кейна менее существенно сказываются на величине рассчитываемой концентрации носителей заряда, хотя такие отклонения, несомненно, важны в случае вырожденного газа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Равич Ю. И., Ефимова Б. А., Смирнов И. А. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца. М., 1968, 383 с. *2.* Dimmock J. O. k-p theory for the conduction and valence bands of $Pb_{1-x}Sn_xTe$ and $Pb_{1-x}Sn_xSe$ alloys.— J. Phys. Chem. Solids Suppl., 1971, **32**, p. 319—330. *3.* Кучеренко И. В., Моисеенко В. Н., Шотов А. П. Определение параметров зонной структуры полупроводников $Pb_{1-x}Sn_xSe$ из измерений эффекта Шубникова—де-Гааза.— Физ. и техн. полупроводников, 1977, **11**, № 1, с. 162—167. *4.* Грязнов О. С. Вычисление кинетических коэффициентов для полупроводников.— Л., 1977, 167 с.

Поступила в редакцию
13.06.78

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1981, т. 22, № 1

УДК 539.17.01

Н. Ф. НЕЛИПА, А. Е. ПУХОВ

СРЕДНЯЯ МНОЖЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЯДЕР С ЯДРАМИ, В МОДЕЛИ НЕЗАВИСИМЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

Введение. В последние годы разработан ряд моделей [1—3], успешно описывающих различные характеристики адрон-ядерных взаимодействий. Одной из них является модель независимых соударений [2, 3], которая хорошо описывает инклюзивные спектры частиц, рождающихся при столкновении адрона с энергией $E>100$ ГэВ с ядром. Эта модель может быть обоснована в рамках реджионного подхода.

В настоящей работе модель независимых соударений обобщается на случай взаимодействия ядер с ядрами. В § 1 изложены основные положения модели независимых соударений. В § 2 получена формула, выражающая N_{AB} — среднюю множественность частиц, рожденных при столкновении ядер A и B, через $N(s)$ — среднюю множественность нуклон-нуклонных взаимодействий. В § 3 при различных предположениях о поведении $N(s)$ получены формулы, выражающие N_{AB} через N_{pA} и N_{pB} — средние множественности в нуклон-ядерных реакциях. И наконец, в § 4 произведено сравнение теоретических и экспериментальных значений средней множественности.

§ 1. Модель независимых столкновений. Модель независимых столкновений основана на том, что продольное расстояние, на котором происходит взаимодействие адронов, растет с ростом энергии. При достаточно больших энергиях это расстояние становится сравнимым с размером ядра, и налетающий на ядро адрон взаимодействует практи-